

АЛГОРИТМ ВАНГА-ЛАНДАУ: СЛУЧАЙНОЕ БЛУЖДЕНИЕ ПО СПЕКТРУ ЭНЕРГИИ

Л. Н. Щур

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
(ИТФ РАН), Научный центр РАН в Черноголовке

Проведён анализ точности вычисления плотности состояний методом Ванга-Ландау. На примере вычисления плотности состояний двумерной модели Изинга показано, что стандартный метод ведёт к конечной точности вычислений. Проанализирована матрица переходов по спектру энергий и показано, что она является стохастической. Это наблюдение даёт возможность замены эвристического требования равномерности гистограммы на физическое требование регулирования точности заполнения столбцов матрицы переходов. Ставится вопрос о модификации стандартного метода Ванга-Ландау. Проанализированы пути эффективной параллелизации метода для возможности его реализации на массивно-параллельных суперкомпьютерных системах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (проект № 14-21-00158).

Ключевые слова: метод Монте-Карло, плотность состояний спектра энергий, метод Ванга-Ландау, матрица переходов, точность вычислений, параллельные алгоритмы.

ВВЕДЕНИЕ

Для моделирования современных задач в области математической физики необходимо применение методов, которые обладают такими свойствами как хорошее масштабирование при параллельных вычислениях, возможность повышения точности вычислений, а также преодоления критического замедления и т. п. Например, в такой области как исследование свойств термодинамических систем, наиболее употребим и универсален метод Метрополиса [Metropolis et al., 1953]. Он обладает свойствами хорошей масштабируемости при параллельных вычислениях и возможностью повышения точности вычислений. Его применение, однако, становится затруднительным в критической области, области вблизи фазового перехода. В случае фазового перехода второго рода он проявляет свойства критического замедления, т. е. замедления скорости релаксации, что делает его применение затруднительным для систем большого размера. Кроме того, его применение не всегда ведёт к вопросу об ответе на вопрос о типе фазового перехода, т. е. дифференциации фазового перехода первого и второго рода.

Кластерные методы Свендсена-Ванга [Swendsen, Wang, 1987] и Вольфа [Wolff, 1988] позволяют преодолеть критическое замедление. Это связано с тем, что метод Метрополиса является локальным, в то время как размер корреляций растёт по мере приближения к критической точке. Кластерные методы работают именно на корреляционной длине, поэтому замедление, если и имеет место, практически незначительно. Недостатком кластерных методов является принципиальная сложность их параллелизации, поскольку

Щур Лев Николаевич — заведующий отделом, доктор физико-математических наук, профессор, shchur@chg.ru

в процессе их применения строится кластер, распространяющийся сложным образом по всему размеру моделируемой системы. Этот метод так же, как и метод Метрополиса, сложно применить к ответу на вопрос о типе фазового перехода. Кластерные методы основаны на представлении статистической суммы в виде разложения по кластерам [Hoshen, Kopelman, 1976].

Метод Ванга-Ландау [Wang, Landau, 2001] основан на представлении статистической суммы в виде разложения по плотности состояний энергии (см. следующий раздел). Метод свободен от критического замедления и, как будет обсуждено ниже, хорошо масштабируется при параллельных вычислениях. Метод позволяет ответить на вопрос о типе перехода.

В настоящей работе выявлено, что существующая реализация метода Ванга-Ландау имеет ограниченную точность. Известно также, что существующая реализация ведёт к неправильным результатам в случае непрерывного спектра и в случае смешанного взаимодействия с конкурирующими членами. В работе обсуждаются пути построения реализации метода, свободного от указанных недостатков.

МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Для анализа свойств статистической системы необходимо вычислить её статистическую сумму Z . Метод Метрополиса основан на представлении статистической суммы в виде суммы по номеру состояния системы i

$$z = \sum_i \exp\left(\frac{-E_i}{kt}\right),$$

где E_i — энергия системы в состоянии с номером i ; t — температура; k — постоянная Больмана.

Методы в этой работе мы будем обсуждать в применении к модели Изинга [Ising, 1925]. Это простейшая модель ферромагнетика, в которой в узлах регулярной гиперкубической решётки помещаются переменные s_i , принимающие значения $+1$ и -1 , а на рёбрах — константы J_{ij} . Строится функция

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i,$$

где сумма производится по всем парам ближайших соседей i и j . Переменные s_i называются спинами, h играет роль внешнего магнитного поля и E является энергией системы. В случае нулевой температуры эта система классических спинов упорядочена, но значение энергии двукратно вырождено — спины могут принимать значение $+1$ (смотреть всё вверх) или -1 (смотреть всё вниз). В случае одномерной решётки, как показал Е. Изинг, фазовый переход отсутствует. Модель Изинга на квадратной решётке и в нулевом магнитном поле решил Л. Онзагер [Beale, 1996], который обнаружил фазовый переход второго рода (особенность во второй производной логарифма от статистической суммы). Его точное решение используется для проверки методов и алгоритмов, поскольку позволяет точно вычислить значения термодинамических величин на прямоугольной решётке любого конечного размера и при любой величине температуры. Мы будем проверять точность метода именно путём сравнения результатов моделирования с точным решением Онзагера.

Кластерные методы моделирования [Swendsen, Wang, 1987; Wolff, 1988] основаны на представлении статистической суммы q -компонентной модели Поттса в виде разложения по кластерам [Hoshen, Kopelman, 1976]:

$$Z = \sum_{\{G\}} v^{e\{G\}} \cdot q^{k\{G\}},$$

где G — один из кластеров; $e\{G\}$ — число элементов в этом кластере G ; $k\{G\}$ — число таких кластеров.

Метод Ванга-Ландау основан на представлении статистической суммы в виде разложения по числу уровней $g(E)$ с данной энергией E :

$$z = \sum_E g(E) \cdot \exp\left(\frac{-E}{kt}\right).$$

В англоязычной литературе $g(E)$ именуется Density of States, или DoS.

АЛГОРИТМ ВАНГА-ЛАНДАУ

В оригинальной работе Ф. Ванга и Д. П. Ландау [Wang, Landau, 2001] предложен следующий алгоритм, который для определённости будем применять для получения плотности состояний модели Изинга.

Процесс инициализации алгоритма Ванга-Ландау состоит из следующих шагов:

- I1 задаётся начальное состояние значений спинов s_i ;
- I2 вычисляется значение энергии начального состояния E_0 ;
- I3 присваиваются начальные значения плотности состояний $g(E) = 1$ для всех значений энергии E ;
- I4 устанавливаются начальные значения вспомогательной гистограммы $H(E) = 0$ для всех значений E ;
- I5 фиксируется начальное значение параметра $f = 2,718281828$.

Основной цикл алгоритма таков:

- C1 выбирается случайно спин s_i (для этого выбирается случайно узел i на решётке);
- C2 вычисляется энергия E_{k+1} нового состояния решётки с (виртуально) перевёрнутым спином $s_i \rightarrow -s_i$;
- C3 если $g(E_{k+1}) < g(E_k)$, то принимается новое состояние;
- C4 если нет, то принимается новое состояние с вероятностью $g(E_k)/g(E_{k+1})$;
- C5 если не произошло событий C4 и C5, то состояние остаётся неизменённым.

Основной цикл алгоритма повторяется MN раз, где N — это число спинов в системе; M — параметр алгоритма, некоторое большое число, имеющее значение, например, 10^4 . После этого проверяется свойство «ровности» диаграммы. Эмпирически предлагается повторять процесс до тех пор, пока элементы вспомогательного алгоритма будут отличаться не более чем на 5%. Если гистограмма недостаточно «ровная», то шаги основного цикла C1–C5 повторяются ещё MN раз.

Если желаемый уровень «ровности» диаграммы достигнут, то делают такие операции нормировки (сравнение с операциями инициализации I3–I5):

- S1 нормируются значения плотности состояний $g(E)$ для всех значений энергии E так, чтобы была выполнена нормировка на единицу значения плотности состояний энергии основного состояния моделируемой системы $g(E_{gs}) = 1$;
- S2 устанавливаются значения вспомогательной гистограммы $H(E) = 0$ для всех значений E ;
- S3 изменяется текущее значение параметра $f = f^{1/2}$.

Процессы основного цикла и нормировки повторяем до тех пор, пока значение параметра f не приблизится (близко) к 1, например $\log f = 10^{-9}$.

Принятие нового состояния на шагах основного цикла C3 и C4 состоит из таких операций:

- A1 переворот спина $s_i := -s_i$;
- A2 изменение значения DoS с текущим значением E_{k+1} энергии системы, $g(E_{k+1}) := fg(E_{k+1})$;
- A3 изменение значения вспомогательной гистограммы $H(E_{k+1}) := H(E_{k+1}) + 1$.

Непринятие нового состояния на шаге основного цикла C5 состоит из таких операций:

- N1 изменение значения DoS с текущим значением E_k энергии системы, $g(E_k) := fg(E_k)$;
- N2 изменение значения вспомогательной гистограммы $H(E_k) := H(E_k) + 1$.

ТОЧНОСТЬ АЛГОРИТМА ВАНГА-ЛАНДАУ

На рис. 1 приведено сравнение точного результата для плотности состояний энергии и вычисленного по алгоритму Ванга-Ландау для двумерной модели Изинга на квадратной решётке с линейным размером $L = 16$.

Отметим замечательное совпадение расчётных значений плотности состояний на масштабах рисунка. На самом деле, совпадение результатов не столь замечательно выглядит на следующем рисунке (рис. 2), где мы отложили по вертикали относительное отклонение вычисленных двумя способами значений плотности состояний, т. е. величины $1 - \log g(E_{Beale}) / \log g(E_{WL})$.

Если относительная точность вычисления в центре распределения достигает значений на порядок лучше процента, то на краях она велика, в несколько процентов. Более того, точность вычисления слабо зависит от выбора параметров. Можно менять степень «ровности» гистограммы, выбирать различную энергию для нормировки плотности состояний для осуществления нормировки в операции S1 или способ приближения параметра f к единице в операции S3 — всё это мало влияет на точность вычисления плотности состояний. Типичное поведение относительной точности приведено на рис. 3, где показано изменение точности вычислений по мере итераций основного процесса — точность выходит на насыщение.

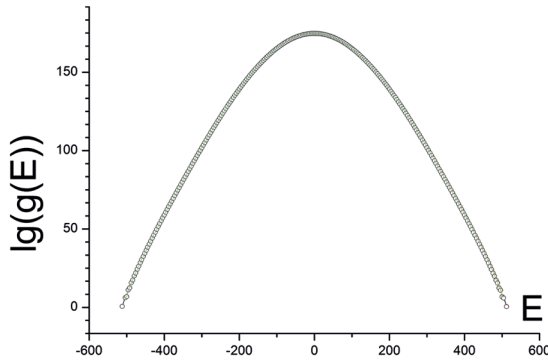


Рис. 1. Логарифм плотности состояний энергии двумерной модели Изинга на квадратной решётке с числом спинов 16×16 . Сплошная линия — точный аналитический результат, вычисленный по формулам из работы [Beale, 1996]. Кружки — расчёт по алгоритму Ванга-Ландау [Wang, Landau, 2001] с параметрами, указанными в описании алгоритма

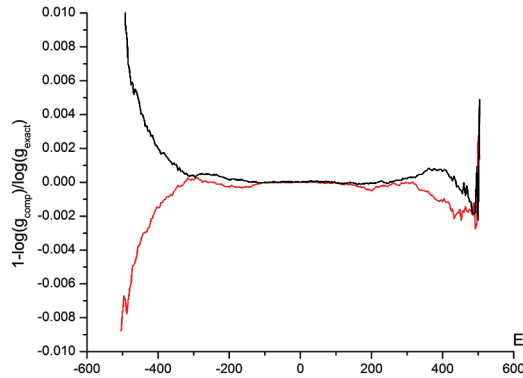


Рис. 2. Относительная точность вычисления плотности состояний для двух способов вычисления — по точным аналитическим выражениям Биля [Beale, 1996] и по алгоритму Ванга-Ландау [Wang, Landau, 2001]. Цветами выделены две реализации

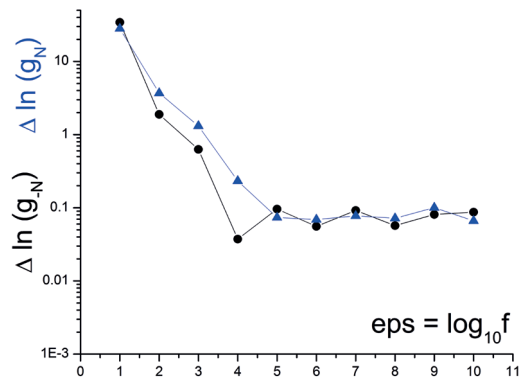


Рис. 3. Изменение усреднённой по состояниям относительной точности вычисления плотности состояний. Параметры моделирования — модель Изинга с числом спинов 8×8 , параметр $M = 10^7$. Цветами выделены две реализации

ПУТИ МОДИФИКАЦИИ АЛГОРИТМА ВАНГА-ЛАНДАУ

Наше предложение по модификации метода Ванга-Ландау основано на наблюдении в статистике переходов по спектру энергий. Ограничимся дискретным спектром значений энергии системы. Пронумеруем состояния дискретного спектра. Построим матрицу M переходов между состояниями с номерами k и k' . Оказывается, эта матрица является стохастической при приближении параметра f к 1. Это свойство можно использовать для модификации алгоритма Ванга-Ландау.

В описанном выше оригинальном алгоритме Ванга-Ландау заменим гистограмму H матрицей переходов M . Именно, сделаем следующие изменения в алгоритме (обозначим их добавочной буквой m в описании алгоритма):

- I4m установим начальные значения матрицы переходов $H(k, k') = 0$ между всеми номерами уровней энергии E ;
- S2m установим значения матрицы переходов $H(k, k') = 0$ между всеми номерами уровней;
- A3 увеличим значения элемента матрицы переходов $M(k, k+1) := M(k, k+1) + 1$;
- A3 увеличим значения элемента матрицы переходов $M(k, k) := M(k, k) + 1$.

Критерий «ровности» вспомогательной гистограммы заменяем на критерий выполнения условия стохастичности матрицы M , т. е. точности выполнения условия того, что сумма по столбцам матрицы M должна быть единицей. Таким образом, мы заменяем эмпирическое требование «плоскости» гистограммы на естественное требование стохастичности матрицы, что присуще самому процессу блуждания по спектру энергий.

НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ФУНКЦИИ DOS В МЕТОДЕ ВАНГА-ЛАНДАУ

Для проверки устойчивости функции плотности состояний энергии был проведён следующий численный эксперимент. В качестве начального состояния (шаг I3 алгоритма Ванга-Ландау) мы выбирали точное аналитическое решение Биля [Beale, 1996]. Алгоритм применялся с различными начальными значениями параметра f (шаг I5), брались значения от $\log(f) = 1$ до $\log(f) = 10^{-9}$. Во всех случаях предельное значение ошибки стремилось приблизительно к тому, которое показано на рис. 3.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проанализирован алгоритм Ванга-Ландау вычисления плотности состояний спиновых систем. На примере двумерной модели Изинга без магнитного поля обнаружено, что алгоритм не позволяет вычислить плотность состояний в произвольной точностью. Напротив, обнаружено, что применение алгоритма ведёт к отходу от точного состояния. Обнаружено также, что алгоритм обеспечивает случайное блуждание по состояниям энергии таким образом, что матрица переходов между энергиями является стохастической.

Это свойство позволяет заменить эмпирическое условие «ровности» гистограммы на естественное условие точности выполнения условия стохастичности матрицы переходов, что позволяет оптимизировать время вычисления. Тем не менее, по-прежнему это не позволяет повысить точность вычисления. Необходимо проведение дополнительных исследований по поиску естественного параметра взамен параметра алгоритма f .

ЛИТЕРАТУРА

- [Beale, 1996] *Beale P. D.* Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model // *Physical Review Letters*. 1996. V. 76. Iss. 1. P. 78.
- [Hoshen, Kopelman, 1976] *Hoshen J., Kopelman R.* Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // *Physical Review B*. 1976. V. 14. Iss. 8. P. 3438.
- [Ising, 1925] *Ising E.* Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus // *Zeitschrift für Physik*. 1925. V. 31. P. 253–258.
- [Metropolis et al., 1953] *Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E.* Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // *J. Chemical Physics*. 1953. V. 21. N. 6. P. 1087–1092.
- [Swendsen, Wang, 1987] *Swendsen R. H., Wang J.-S.* Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // *Physical Review Letters*. 1987. V. 58. N. 2. P. 86.
- [Wang, Landau, 2001] *Wang F., Landau D. P.* Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // *Physical Review Letters*. 2001. V. 86. P. 2050–2053.
- [Wolff, 1988] *Wolff U.* Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems // *Physical Review Letters*. 1988. V. 62. P. 361.

ALGORITHM WANG-LANDAU: RANDOM WALK IN ENERGY SPECTRUM

L. N. Shchur

Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences,
Science Center in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences

Analysis of the accuracy of density of state estimation using Wang-Landau method was done. It is demonstrated using example of two-dimensional Ising model, that method leads to the finite accuracy of estimations. Matrix of transitions in energy spectrum were constructed and appears to be the stochastic one. These observations bring possibility to substitute heuristic requirement of the histogram flatness with the physical requirement of tuning accuracy of columns in the transition matrix. We formulate question on the modification of Wang-Landau method. The possible approach to the effective parallelization were analyzed and provide possibility for realizations on the massively parallel supercomputers. Supported by Russian Scientific Foundation through the grant 14-21-00158.

Keywords: Monte Carlo method, density of states. Wang-Landau method, transition matrix, accuracy of computations, parallel algorithms.

Shchur Lev Nikolaevich — head of department, doctor of physical and mathematical sciences, professor, shchur@chg.ru